ОБ ОДНОЙ МОДЕЛИ ЗАРОЖДЕНИЯ И РАСПРОСТРАНЕНИЯ ТРЕЩИН В НАНОСЛОЯХ

[1]Стружанов В. В., [2]Коркин А. В., [1]Тарташник К. А.

[1]ИМАШ Уро РАН, Екатеринбург, Россия
[2]Уральский федеральный университет им. первого Президента России Б. Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия

e-mail: stru@imach.uran.ru, alexkorkin@list.ru, tartashnik@mail.ru

Аннотация. В работе исследуется устойчивость процесса деформирования механической системы градиентного типа, состоящей из слоя наноэлементов с дефектом типа вакансии. Слой расположен в массиве упругого материала, через который передается нагрузка растяжения. Взаимодействие между элементами задано функциями, имеющими восходящие и падающие ветви. Установлено, что трещина в слое наноэлементов образуется в результате потери устойчивости процесса деформирования системы вследствие перехода некоторых связей между наноэлементами на падающую ветвь.

Ключевые слова: нанослой, механическая система, лагранжиан, уравнение равновесия сил, матрица Гессе, сепаратриса.

A MODEL OF INITIATION AND PROPAGATION OF CRACKS IN THE NANOLAYERS

V. V. Struzhanov[1], A. V. Korkin[2], K. A. Tartashnik[1]

[1]IMASH Ural RAS, Ekaterinburg, Russia
[2]Ural Federal University, Ekaterinburg, Russia

e-mail: stru@imach.uran.ru, alexkorkin@list.ru, tartashnik@mail.ru

Abstract. The stability of the deformation process of a gradient-type mechanical system consisting of a layer of nanoelements with a vacancy-type defect is investigated. The layer is located in an array of elastic material through which the tensile load is transmitted. The interaction between the elements is defined by functions having ascending and descending branches. It is found that the crack in the layer of nanoelements is formed as a result of the loss of stability of the deformation process of the system due to the transition of some bonds between the nanoelements on the falling branch.

Key words: nano-layer, mechanical system, Lagrangian, equation of equilibrium of forces, Hessian, separates.

1. Введение

Разрушение механических систем есть явление такого же порядка, что и потери устойчивости процесса и деформирования [1]. Возможность потери устойчивости связана с переходом части материала на стадию разупрочнения, которая характеризуется падающей ветвью диаграммы деформирования [2]. Так же и трещина в материале элемента конструкции возникает в результате потери устойчивости сама сопротивление материала в некоторой локальный области. Таким образом, для исследования данных явлений необходим новый математический аппарат, отличающийся от аппарата математического анализа и учитывающий невыполнение условий Адемара. Таким аппаратом является аппарат математической теории катастроф [3, 4]. Естественно исследовать процесс возникновения и распространения трещин как потерю устойчивости следует начинать с простых механических систем, которые могут стать модельными примерами для общей теории и помогут установить связь между теорией и практикой и отточить физическую интуицию. То есть начинать с предметов наиболее простых и наиболее легко познаваемых и восходя постепенно к познанию наиболее сложного [4].

В данной работе рассматривается простая градиентная механическая система, содержащие слой наноэлементов с дефектом типа вакансии. Взаимодействия между элементами заданы функциями. Слой скреплен с массивом упругого материала, через который передается нагрузка растяжения имеющими восходящие и падающие ветви, тогда расхождения элементов принимают неустойчивый характер. Выписан лагранжиан этой системы для квазистатического нагружения и соответствующем уравнение равновесия, связывающие параметр уравнения (нагружение) и параметры состояния (обращенные координаты системы). Эти уравнения определяют критические точки лагранжиана – точки равновесия (устойчивого или неустойчивого). Согласно положениям теории катастроф устойчивость и неустойчивость определяется матрицей Гессе данного лагранжиана (потенциальной функции системы). Равенство нулю детерминанта матрицы Гессе в какой-либо критической точке определяет переход в неустойчивое состояния и соответственно потерю устойчивости растяжение системы. В этот момент и возникает трещина в зоне вакансии. Показано, что распространение трещины зависит от жёсткости массива упругого материала. Если жесткость мала, то трещина распространяется сразу на весь слой наноэлементов. Если велика, то распространения трещины происходит скачкообразно, по мере возрастания деформации растяжение.

2. Механическая модель

Исследование механизма образования трещин в нанослоях, не теряя общности рассуждений, проведем на модельном пример, рассматривая следующую механическую систему (рис. 1). Слой наноэлементов, обозначенных на рисунке точками 1, … , 7, расположен между бездефектным упругим материалом, который представлен прямоугольниками I и II. Жесткость при растяжении этих прямоугольников вдоль оси Oy равна λ. Элементы 4–7 жестко скреплены с этими прямоугольниками. Слой элементов имеет дефект типа вакансии (отсутствует элемент в начале системы координат xOy). Силы взаимодействия между элементами на коротких расстояниях (1–6, 1–2, и т.п.) заданы функцией $\Phi_1 = cw\exp(-aw)$, а на длинных расстояниях (1–7, 1–5, и т.п.) – функцией $\Phi_2 = cz\exp(-bz)$, ($b > a$). Здесь w, z – увеличения соответствующих расстояний, c, a, b – константы. Взаимодействие элементов на больших расстояниях слабее, чем на коротких. Отметим, что силы взаимодействия Φ_1 и Φ_2 аналогичны силам взаимодействия между атомами, определяемыми различными потенциалами, например, Морса [5], Новожилова В.В. [6, 7]. Их графики имеют восходящие и падающие ветви (рис. 2.), которые характеризуют неустойчивость растяжения [6, 7].

Будем растягивать систему квазистатически при постоянной температуре, задавая граница AB и CD постоянно возрастающее вертикальное перемещение, равное u. При этом точки нижних границ упругого материала получают вертикальные перемещения, равные v. Такое же перемещение получают элементы 4–7. Элементы 1–3 в силу симметрии системы будут иметь только горизонтальные перемещения x_1, x_2, x_3, направленные вдоль оси Ox (рис. 1). Величина u играет роль параметра уравнения (задаваемая величина), а величины v, x_1, x_2, x_3 – параметров состояния (обобщенные координаты системы).

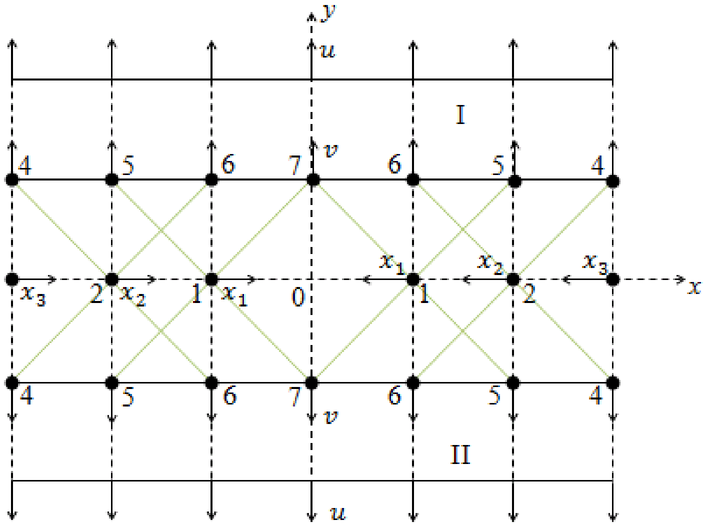

Рис. 1. Модель механической системы

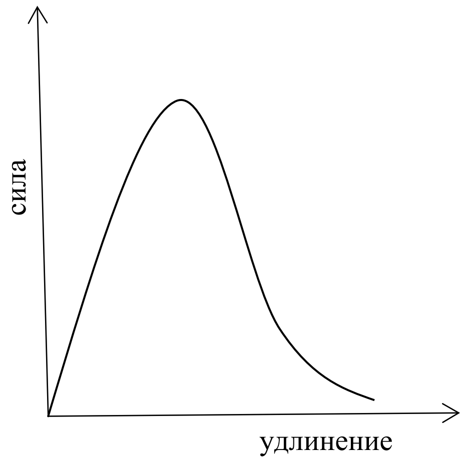

Рис. 2. График взаимодействий

3. Уравнения равновесия и матрица Гессе

Выпишем лагранжиан системы, который равен энергии деформации при квазистатическом растяжении. Имеем

$$\Pi = 4\int_0^{m_1} \Phi_2(z)dz + 4\int_0^{m_2} \varphi_2(z)dz + 4\int_0^{m_3} \varphi_2(z)dz +$$
$$+4\int_0^{n_1} \Phi_2(z)dz + 4\int_0^{n_2} \varphi_2(z)dz + 2\int_0^{x_1-x_2} \Phi_1(\rho)d\rho +$$
$$+2\int_0^{x_3-x_2} \Phi_1(\rho)d + 4\int_0^{s_1} \Phi_1(\rho)d\rho + 4\int_0^{s_2} \Phi_1(\rho)d\rho + 4\int_0^{s_3} \Phi_1(\rho)d\rho +$$
$$+\lambda(u-v)^2.$$

Здесь $m_i = \sqrt{(1+v)^2 + (1-x_i)^2} - \sqrt{2}\ (i = 1,2,3)$ – удлинения расстояния между элементами соответственно 1–7, 2–6, 3–5; $n_j = \sqrt{(1+v)^2 + (1+x_j)^2} - \sqrt{2}\ (j = 1,2)$ –

удлинения расстояния между элементами соответственно 1–5, 2–4; $s_k = \sqrt{(1+v)^2 + x_k^2} - 1$ $(k = 1, 2, 3)$ – удлинения расстояния между элементами соответственно 1–6, 2–5, 3–4; $x_2 - x_1$ – удлинения расстояния между элементами соответственно 1–2; $x_3 - x_2$ – удлинения расстояния между элементами соответственно 2–3. Последнее слагаемое – это энергия деформации упругих прямоугольников I и II. Короткие расстояния между наноэлементами в недеформированном состоянии, не нарушая общности рассуждений, полагаются равными единице. Теперь, используя уравнения Лагранжа второго рода [8] получаем уравнения равновесия рассматриваемой градиентной механической системы при ее квазистатическом нагружении, а именно,

$$\frac{\partial \Pi}{\partial v} = 0, \frac{\partial \Pi}{\partial x_1} = 0, \frac{\partial \Pi}{\partial x_2} = 0, \frac{\partial \Pi}{\partial x_3} = 0. \tag{1}$$

Решение этой системы нелинейных уравнений есть критические точки (точки экстремумов) функции П, в которых система находится в равновесии (устойчивом или неустойчивом) при заданном значении параметра управления u.

Тип равновесия определяется матрицей Гессе функции П [3, 4] (матрицей вторых производных)

$$H(\Pi) = \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 \Pi}{\partial v^2} & \frac{\partial^2 \Pi}{\partial v \partial x_1} & \frac{\partial^2 \Pi}{\partial v \partial x_2} & \frac{\partial^2 \Pi}{\partial v \partial x_3} \\ \frac{\partial^2 \Pi}{\partial x_1 \partial v} & \frac{\partial^2 \Pi}{\partial x_1^2} & \frac{\partial^2 \Pi}{\partial x_1 \partial x_2} & \frac{\partial^2 \Pi}{\partial x_1 \partial x_3} \\ \frac{\partial^2 \Pi}{\partial x_2 \partial v} & \frac{\partial^2 \Pi}{\partial x_2 \partial x_1} & \frac{\partial^2 \Pi}{\partial x_2^2} & \frac{\partial^2 \Pi}{\partial x_2 \partial x_3} \\ \frac{\partial^2 \Pi}{\partial x_3 \partial v} & \frac{\partial^2 \Pi}{\partial x_3 \partial x_1} & \frac{\partial^2 \Pi}{\partial x_3 \partial x_2} & \frac{\partial^2 \Pi}{\partial x_3^2} \end{pmatrix}$$

Если матрица Гессе в критической точке положительно определена, то в этой точке функция П выпуклая вниз [9] и положение равновесия устойчиво. Если отрицательно определена, то выпуклая вверх [9] и равновесие неустойчиво. Когда детерминант матрицы Гессе в критической точке равен нулю, то это пограничная точка – точка перехода от устойчивости к неустойчивости, или наоборот. Уравнения, получающиеся приравниваем к нулю детерминанта матрицы Гессе выделяет из множества критических точек дважды вырожденные критические точки. Отображая эти точки в пространство управлений посредством уравнений равновесия? Получаем сепаратрису потенциальной функции [3, 4]. Потеря устойчивости происходит тогда, когда путь нагружения выходит из области, ограниченной сепаратрисой.

4. Сепаратриса

При реализации изменённой выше схемы необходимо находить решения большого числа нелинейных уровней, что представляет собой достаточно сложную задачу. Этих проблем можно избежать, если использовать следующую численную процедуру. Для анализа устойчивости необходимо знать только вырожденные критические точки, которые удовлетворяют уравнению detH(П) = 0.

Возьмем евклидово пространство $R^4 \times R$, элементами которого являются параметры состояния системы и параметр уравнения. Рассмотрим пятимерный куб в этом пространстве и разобьем его на множество самоподобных кубиков с некоторым, достаточно малым шагом. Совершая обход по вершинам кубов разбиения, подставляем координаты этих вершин в матрицу Гессе и, вычисляя гессиан, получаем область устойчивости, где значения детерминанта матрицы Гессе будут принимать положительные значения, и область неустойчивости, где они будут отрицательными. Затем берем точки с границы областей устойчивости и неустойчивости, где гессиан достаточно близок к нулю. Подставляя в уравнение равновесия получаем искомые вырожденные критические точки, где происходит смена устойчивости на неустойчивость.

5. Качественное исследование

Приближенное решение уравнения равновесия (1) позволяет сделать следующие выводы. Трещина зарождается в месте дефекта. Характер её распространения зависит от величины λ – жёсткости системы, передающей нагрузку на нанослой. Если она мала, то происходит внезапное раскрытие трещины по всей длине нанослоя. На рис. 3. показана количественная прямая равновесных состояний рассматриваемой механической системы. Сепаратриса в пространстве уравнения состоит из двух точек, а именно $u = 0$ и $u = u^*$.

После достижения параметра уравнение величины u^*происходит потеря устойчивости всей системы, в результате которого трещина внезапно раскрывается по всей длине нанослоя. Нанослой разрушен и при последующем нагружении $u = v$. Если жесткость нагружаемой системы велика, то раскрытие трещины происходит постепенно и малыми скачками (рис. 4).

После первого скачка сепаратриса системы изменяется и уже определяется в пространстве управления точками $u = u_1$ и $u = u_2$, и так далее.

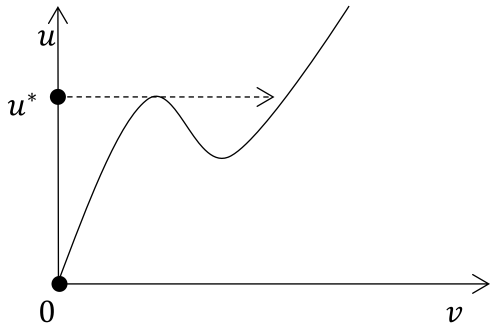

Рис. 3. Количественная прямая равновесных состояний

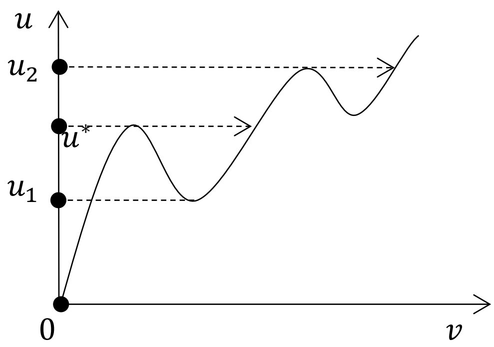

Рис. 4. Раскрытие трещины в нагружаемой системе

6. Заключение

Рассмотрена модельная механическая градиентная система, включающая слой наноэлементов, взаимодействие между которыми задано функциями с падающими ветвями, отражающими неустойчивые состояния. Изложена методика исследования устойчивости всей системы, связанная с раскрытием трещины в нанослое. Показана зависимость характера распространения трещины от жесткости окружающего упругого материала, передающего нагрузку на нанослой с дефектом типа вакансии.

Список литературы

1. Седов Л.И. Механика сплошных сред. Т.1. М.: Наука, 1970. 492 с.

2. Стружанов В.В., Миронов В.И. Деформационное разупрочнение материала в элементах конструкций. Екатеринбург: УрО РАН, 1995. 190 с.

3. Постон Т., Стюарт И. Теория катастроф и ее приложения. М.: Мир, 1980 608 с.

4. Гилмор Р. Прикладная теория катастроф. Кн.1. М.: Мир, 1984. 350 с.

5. Декарт Р. Рассуждение о методе для хорошего направления разума и отыскания истины в науках. М.: Избранные произведения, 1950. С. 217-273.

6. Томсон Дж.М.Т. Неустойчивости и катастрофы в науке и технике. М.: Мир, 1985. 254 с.

7. Новожилов В.В. К основам теории равновесных трещин в упругих телах // ПММ, 1969. Т.33, Вып.5. С. 797-812.

8. Новожилов В.В. О необходимом и достаточном критерии хрупкой прочности // ПММ, 1969. Т.33, Вып.2. С. 212-222.

9.Парс Л.А. Аналитическая динамика. М.: Наука, 1971. 636с.

10. Хорн Р., Джонсон Н. Матричный анализ. М.: Мир, 1989. 655с.